

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ  
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ  
ÚSTAV FYZIKÁLNÍHO INŽENÝRSTVÍ  
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING  
INSTITUTE OF PHYSICAL ENGINEERING

## PLAZMONICKÉ REZONANČNÍ ANTÉNY PLASMONIC RESONANT ANTENNAS

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE  
BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE  
AUTHOR

MICHAL KVAPIL

VEDOUČÍ PRÁCE  
SUPERVISOR

Ing. ONDŘEJ TOMANEC

## **Abstrakt**

V první části práce je diskutováno použití kovových nano- a mikročástic v plasmonice a dále také možnost měření rezonančních spekter kovových nanostruktur pomocí fotoluminiscence. Hlavní část práce se zabývá testováním možnosti použití softwaru Lumerical FDTD Solution 5.1.3 k simulaci lokální excitace elektrického pole v blízkém okolí plasmonických rezonančních antén a prezentací výsledků těchto simulací. Nakonec je provedeno srovnání výsledků simulace s analytickým výpočtem.

## **Summary**

In the first part, using of nano- and microparticles in the plasmonics as well as the possibility of measurement resonant spectra of metallic nanostructures by photoluminescence are discussed. The main part of the work is focused on testing the possibility of using software Lumerical FDTD Solution 5.1.3 to simulate of near field enhancement in the vicinity of plasmonic resonant antennas. Finally the results of simulations and analytical computation are confronted.

## **Klíčová slova**

simulace, FDTD, blízké pole, plasmonické rezonanční antény.

## **Keywords**

simulation, FDTD, near field, plasmonic resonant antennas.

KVAPIL, M. *Plazmonické rezonanční antény*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2008. 29 s. Vedoucí bakalářské práce Ing. Ondřej Tomanec.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil pouze podklady uvedené v příloženém seznamu.

Michal Kvapil



Děkuji Ing. Ondřeji Tomancovi za vedení při mé práci, prof. RNDr. Tomáši Šikolovi, CSc. a Ing. Radku Kalouskovi, Ph.D. za cenné připomínky a náměty a Lukáši Břínkovi za bleskurychlé zasvěcení do simulačního programu.

Michal Kvapil

# Obsah

<b>1 Úvod</b>	<b>2</b>
<b>2 Užití kovových nano a mikročástic v plasmonice</b>	<b>3</b>
2.1 O plasmonice . . . . .	3
2.1.1 Historie plasmoniky . . . . .	3
2.1.2 Povrchové plasmonové polaritony . . . . .	3
2.1.3 Lokalizované povrchové plasmony . . . . .	4
2.2 Nano a mikrostruktury v plasmonice . . . . .	4
2.2.1 Vlnovody a jiné ekvivalenty optických prvků . . . . .	4
2.2.2 Rezonanční antény . . . . .	6
2.2.3 Využití plasmonů nanočástic v jiných oblastech . . . . .	7
<b>3 Optická luminiscence</b>	<b>8</b>
3.1 Luminiscence . . . . .	8
3.2 Optická luminiscence nanostruktur . . . . .	8
3.2.1 Princip optické luminiscence . . . . .	8
3.2.2 Princip měření rezonančních spekter nanostruktur pomocí optické luminiscence . . . . .	9
<b>4 Simulace a vyhodnocení</b>	<b>11</b>
4.1 Metoda FDTD . . . . .	11
4.2 Simulované antény . . . . .	11
4.3 Simulace . . . . .	13
4.3.1 Lokální navýšení elektrického pole v okolí antén a jeho útlum s rostoucí vzdáleností od antény . . . . .	13
4.3.2 Vliv hustoty simulační sítě na simulované vlastnosti pole . . . . .	14
4.3.3 Vliv tvaru antény na simulované vlastnosti pole . . . . .	15
4.3.4 Závislost rezonanční vlnové délky na vlnové délce dopadajícího záření a na rozměru antény . . . . .	18
4.3.5 Vliv normalizace amplitud jednotlivých vln ve vlnovém klubku . . . . .	20
<b>5 Srovnání s teoretickým výpočtem</b>	<b>22</b>
5.1 Formulace problému . . . . .	22
5.2 Simulace a analytický výpočet . . . . .	23
<b>6 Závěr</b>	<b>25</b>
<b>Literatura</b>	<b>27</b>
<b>Seznam použitých zkratk</b>	<b>29</b>

# 1. Úvod

Plasmonika, jako vědní obor zabývající se interakcí elektromagnetického záření se strukturami o rozměrech menších nebo podobných jako je vlnová délka tohoto záření, zaznamenala v posledních několika letech mohutný rozmach. Pokroky v nanotechnologiích a jejich stále větší uplatnění v praxi zvýšily již tak velký zájem o studium různých vlastností nanostruktur, a tedy i toho jak s nimi interaguje elektromagnetické pole.

Navíc se ukazuje, že elektromagnetické pole v malých vzdálenostech od nanostruktur má velmi zajímavé a v praxi využitelné vlastnosti. Jednou z pravděpodobných budoucích aplikací plasmoniky je tvorba počítačových čipů pracujících na frekvencích v řádu terahertz. Takže i nadále lze očekávat rostoucí zájem o plasmoniku a o nanofotoniku jako celek.

V následující kapitole uvádíme některá využití nano- a mikročástic v plasmonice. Dále se jen velmi stručně zmiňujeme o oblastech, ve kterých jsou také užívány poznatky z plasmoniky v kombinaci s nanočásticemi.

Třetí kapitola je věnována obecnému pojednání o měření plasmonických rezonančních spekter pomocí optické luminiscence.

Čtvrtá kapitola tvoří hlavní náplň této práce. Pojednává o ověření možnosti použití softwaru Lumerical FDTD Solution 5.1.3 k simulaci navýšení lokálního elektrického pole v okolí plasmonických rezonančních antén.

V páté kapitole srovnáváme výsledky získané simulací v tomto programu s výsledky analytického výpočtu prováděného v prostředí Maple. Srovnání provádíme na analyticky řešitelném problému rozptylu elektromagnetického záření na kulové nanočástici v kvazistatické aproximaci.

## 2. Užití kovových nano a mikročástic v plasmonice

### 2.1. O plasmonice

Plasmonika je hlavní částí nanofotoniky, která studuje vlastnosti elektromagnetického pole v rozměrech menších nebo srovnatelných s vlnovou délkou elektromagnetického vlnění. Je založena na interakci elektromagnetického záření a vodivostních elektronů na rozhraní kovů nebo na kovových nanostrukturách. Plasmonika se věnuje hlavně povrchovým plasmonovým polaritonům (Surface Plasmon Polariton, SPP), dále jen plasmonům a lokalizovaným povrchovým plasmonům (Localized Surface Plasmon, LSP), dále jen lokalizovaným plasmonům.

#### 2.1.1. Historie plasmoniky

Ačkoliv byly oba hlavní předměty zájmu plasmoniky, tj. plasmony a lokalizované plasmony popsány již počátkem 20. století, na své znovuoobjevení, respektive využití, musely čekat až do druhé poloviny 20. století, respektive na počátek 21. století. Matematický popis plasmonů jako povrchových vln byl podán na přelomu 19. a 20. století v pracích E. Sommerfelda (1899) a J. Zennecka (1907), které se zabývaly šířením rádiových vln podél povrchu vodiče o konečné vodivosti. Roku 1902 pozoroval R. W. Wood neobvyklý pokles intenzity viditelného světla vzniklého při odrazu na kovové mřížce. Ale až v roce 1941 U. Fano ve své práci spojil Woodovo pozorování s dřívějšími teoretickými pracemi Sommerfelda a Zennecka. Přibližně v této době také začal být tento ztrátový jev spojován s interakcemi, které probíhají na kovových površích. Navíc R. H. Ritchie v roce 1957 tento jev zaznamenal při difrakci elektronového svazku na tenké kovové fólii a v roce 1968 publikoval práci, ve které spojoval své pozorování tohoto jevu při elektronové difrakci s dřívějším pozorováním stejného jevu při difrakci viditelného světla na kovových mřížkách. Ve stejném roce E. Kretschmann a H. Raether pomocí viditelného světla vybudili tzv. Sommerfeldovy povrchové vlny užitím tzv. prism couplingu. Dále se také v tuto dobu sjednotil popis těchto jevů a vznikl pojem SPP. V následujících letech se dále rozvíjel výzkum SPP v oblasti viditelného spektra a navíc na přelomu 20. a 21. století bylo při experimentech v mikrovlné a infračervené oblasti dosaženo výsledků, které byly předpovězeny v teoretických pracích z počátku 20. století. [9]

První známé využití LSP v kovových nanočásticích pochází již ze starého Říma, kdy se přidáním částecek kovu do skla dosahovalo jeho různého zabarvení. Matematický základ pro popis LSP položil roku 1908 G. Mie.

#### 2.1.2. Povrchové plasmonové polaritony

Povrchové plasmonové polaritony (plasmony) šířící se na rovném rozhraní mezi vodičem a dielektrikem jsou v podstatě dvoudimenzionální disperzní elektromagnetické vlny, související s plynem vodivostních elektronů. Plasmony mají evanescentní charakter na obou stranách rozhraní, tj. s rostoucí vzdáleností od rozhraní mezi kovem a dielektrikem se velmi rychle utlumují. Jejich vybuzení pomocí trojdimenzionálních světelných svazků není možné bez použití speciálních technik. [9]



### 2.1.3. Lokalizované povrchové plasmony

Lokalizované povrchové plasmony (lokalizované plasmony) jsou, na rozdíl od plasmonů, „nešířící se“ excitace vodivostních elektronů v kovových nanočásticích spojené s působením elektromagnetického pole. Tyto excitace jsou navozeny přirozeně při rozptylu oscilujícího elektromagnetického vlnění na vodivé nanočástici o rozměrech menších než je vlnová délka rozptylovaného záření, na nanočásticích dochází k tzv. plasmonové rezonanci. Lokalizované plasmony lze vybudit přímým osvětlením bez nutnosti použití jakýchkoliv speciálních technik.

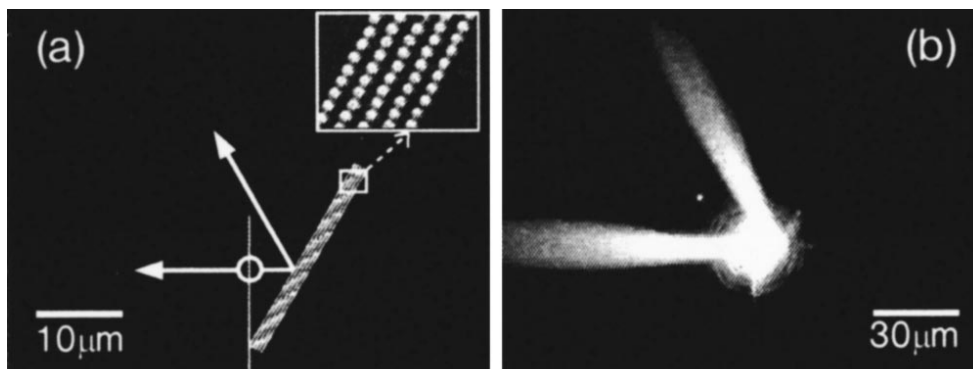
Například pro zlaté nebo stříbrné nanočástice nastává rezonance ve viditelné oblasti spektra. Následkem této rezonance se tyto částice jeví jako jasně barevné jak v prošlém, tak i v odraženém světle. Tento jev je využíván již po mnoho staletí například k barvení skel. [9]

## 2.2. Nano a mikrostruktury v plasmonice

### 2.2.1. Vlnovody a jiné ekvivalenty optických prvků

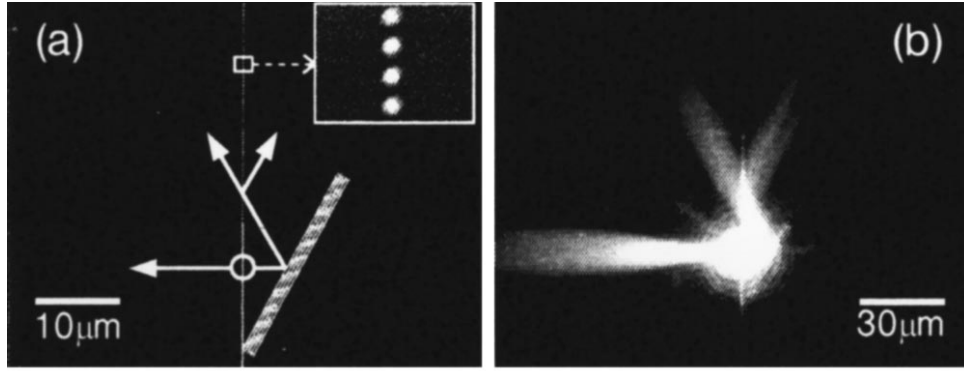
Mimo jiné i v souvislosti s dalším možným vývojem výpočetní techniky a mikroprocesorů se v poslední době hovoří o tom, že by elektronické čipy tvořené tranzistory mohly být nahrazeny čipy plasmonickými, které by operovaly na frekvencích až sto tisíc krát větších. Aby bylo možné tohoto cíle někdy v budoucnu vůbec dosáhnout, musí být vyřešena ještě spousta problémů. Jedním z těchto problémů je i to, jak šířit a usměrňovat plasmony.

Směr šíření plasmonů na rozhraní tenké kovové vrstvy a dielektrika lze kontrolovat prostřednictvím rozptylu plasmonů na uměle vytvořených vadách v jinak dokonale rovné tenké vrstvě. Tyto vady lze vytvořit například depozicí nanočástic na tenkou vrstvu nebo vytvořením rýh v tenké vrstvě. Správným umístěním těchto vad na tenkou vrstvu lze vytvořit struktury, které fungují jako optické prvky, tedy například jako zrcadlo, čočka nebo dělič svazku. Na obrázcích 2.1 a 2.2 jsou znázorněny struktury, které pro šířící se plasmony fungují jako zrcadlo a dělič svazku.



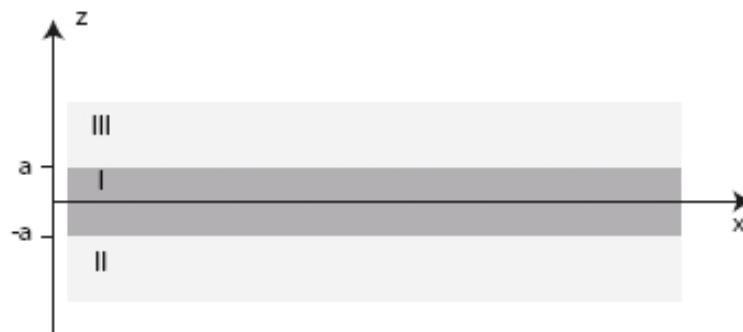
Obrázek 2.1: (a) Snímek pořízený rastrovacím elektronovým mikroskopem. V pravé části je dobře patrné plasmonové zrcadlo, tvořené jednotlivými nanočásticemi o průměru 140 nm a výšce 70 nm. Nanočástice vznikly tak, že úmyslně vytvořené periodické nerovnosti v povrchu substrátu byly pokryty tenkou vrstvou stříbra. Kruh označuje místo, odkud jsou plasmony buzeny a šipky ukazují směr jejich šíření. (b) Stejný snímek pořízený pomocí fluorescence. Koeficient odrazu je  $R \doteq 0,9$ . Převzato z [5].

## 2. UŽITÍ KOVOVÝCH NANO A MIKROČÁSTIC V PLASMONICE



Obrázek 2.2: (a) Snímek pořízený rastrovacím elektronovým mikroskopem. Uprostřed je dobře patrný dělič svazku tvořený opět jednotlivými nanočásticemi o průměru 140 nm a výšce 70 nm. Nanočástice vznikly stejným způsobem jako na obrázku 2.1. Kruh označuje místo, odkud jsou plasmony buzeny a šipky ukazují směr jejich šíření. (b) Stejný snímek pořízený pomocí fluorescence. Převzato z [5].

K šíření plasmonů lze také užít multivrstev izolant - kov - izolant (Insulator - Metal - Insulator, IMI) <sup>1</sup> skládajících se z tenkého kovového proužku uzavřeného mezi dvě dielektrické vrstvy. Tato struktura je znázorněna na obrázku 2.3. Je-li kovový proužek dostatečně tenký, plasmony vznikající na obou rozhraních mezi kovem a izolantem mezi sebou interagují, což vede ke vzniku vázaných módů. Má-li IMI multivrstva symetrickou geometrii a mají-li oba izolanty stejnou dielektrickou funkci, dochází se zmenšující se tloušťkou kovového proužku k výraznému poklesu útlumu šířících se plasmonů a ty se tak mohou šířit do větších vzdáleností. Experimentálně bylo pro vlnovou délku  $\lambda_0 = 1550$  nm ukázáno [4], že zlatý proužek o průřezu  $(8000 \times 20)$  nm<sup>2</sup>, který je obklopen sklem, vede plasmony do vzdálenosti několika mm. Pozdější práce ukázaly, že při šíření plasmonů v podobném proužku může pro tuto vlnovou délku měrný útlum činit pouze 6 dB/cm [12].



Obrázek 2.3: Znázornění multivrstvy IMI. Vrstva I představuje kov, vrstvy II a III dielektrikum. U vrstev MIM je tomu naopak. Převzato z [9].

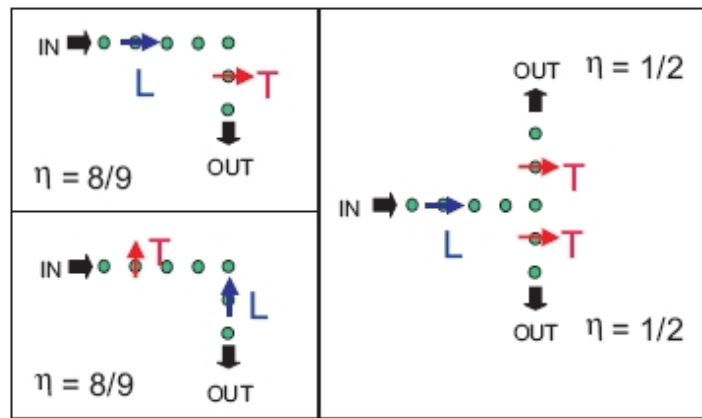
Modifikací vedení plasmonů pomocí multivrstev IMI jsou nanodráty. Nanodrát lze popsat jako multivrstvu IMI, kde oba charakteristické rozměry, šířka i tloušťka kovového proužku, jsou menší než vlnová délka vedených plasmonů. U klasické multivrstvy IMI je pouze tloušťka proužku menší než vlnová délka.

<sup>1</sup>nebo také multivrstev kov - izolant - kov (MIM)

## 2.2. NANO A MIKROSTRUKTURY V PLASMONICE

Silná interakce viditelného světla a kovových nanočástic může být využita při konstrukci plasmonového vlnovodu – pokud tedy dokážeme přenášet energii z jedné nanočástice na další. Dopadá-li na nanočástici kovu viditelné světlo, v částici dochází k plasmonové rezonanci a částice se chová jako dipól. Pole dipólu vzniklé oscilacemi lokalizovaných plasmonů v této nanočástici může vyvolat plasmonové oscilace v okolních nanočásticích, pokud se tyto nanočástice nacházejí v blízkém poli daného dipólu. Mezi částicemi tak přenášíme energii. Rychlost šíření těchto oscilací je největší při rezonanční frekvenci  $\omega_0$  a může dosahovat až desetiný rychlosti světla. To je desetkrát větší rychlost než je rychlost elektronů v dnešních polovodičových součástkách. Měrný útlum takovýchto plasmonových vlnovodů činí kolem  $6 \text{ dB}/\mu\text{m}$  [10]. Útlum způsobený vyzařováním z vlnovodu do vzdáleného pole je minimální. Útlum ve vedení vzniká hlavně vnitřním útlumem povrchových plasmonů z důvodu ohřevu způsobeného elektrickým odporem materiálu nanočástic.

Díky blízkoplní povaze vedení energie v plasmonových vlnovodech se mohou v těchto vlnovodech, narozdíl od optických vlnovodů, vyskytovat například i spojení tvaru „L“ nebo děliče ve tvaru „T“, jak je znázorněno na obrázku 2.4. Ztráty ve spojeních nebo v děličích jsou přitom malé. [10]

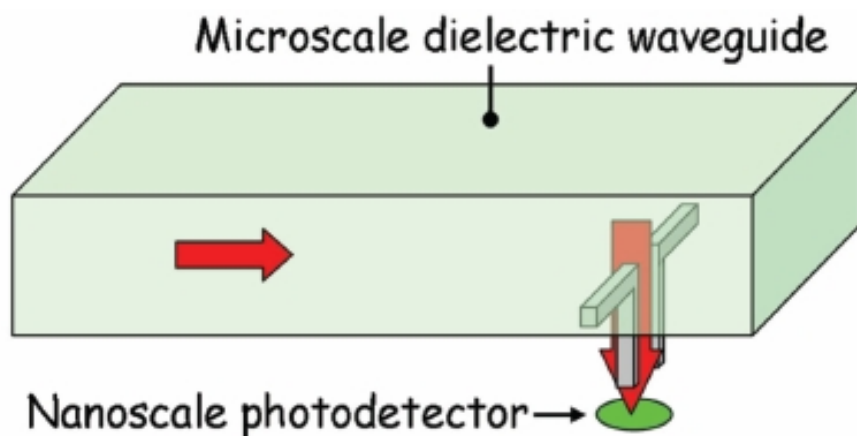


Obrázek 2.4: Koeficient přenosu energie  $\eta$  v řetězci nanočástic. Vidíme, že ztráty vzniklé přenosem energie spojením „L“ jsou přibližně 11 %, ztráty v děliči tvaru „T“ jsou téměř nulové. Černá šipka označuje směr toku energie vlnovodem, modrá longitudální mód plasmonů (L), červená mód transverzální (T). Převzato z [10].

### 2.2.2. Rezonanční antény

Rezonanční frekvenci lokalizovaných plasmonů v kovových nanostrukturách lze ovládat pomocí geometrie těchto struktur. Při rezonanci může být dopadající světlo nanostrukturou absorbováno, nebo rozptýleno. Na plasmonové rezonanční nanostruktury tak lze pohlížet jako na nanoantény pracující na optických frekvencích „napájené“ světelnou vlnou. Tyto nanoantény mohou dopadající světlo vyzářit zpět do volného prostoru nebo tuto světelnou energii vázat s blízkými strukturami, jako jsou tenké vrstvy nebo vlnovody [17]. Jak je naznačeno na obrázku 2.5, nanoantény tak mohou například sloužit k přenosu optického signálu v podobě plasmonů k elektronickým zařízením nanoskopických rozměrů, k nimž není možné přivést klasický optický signál jednoduše proto, že rozměr těchto zařízení je menší než difrakční limit pro světelné záření.

## 2. UŽITÍ KOVOVÝCH NANO A MIKROČÁSTIC V PLASMONICE



Obrázek 2.5: Znázornění nanoantény jako „mostu“ mezi vlnovody mikroskopických rozměrů a elektronickými zařízeními o nanoskopických rozměrech. Převzato z [2].

### 2.2.3. Využití plasmonů nanočástic v jiných oblastech

V předchozí části byla uvedena některá využití nano- a mikrostruktur v plasmonice. Uvedme nyní stručně některé jiné oblasti, ve kterých se využívá plasmonů buzených pomocí nano- a mikrostruktur. Je to například ramanovská spektroskopie (Surface enhanced Raman Spectroscopy, SERS), kde přítomnost nanočástic v okolí zkoumaného vzorku a s ní spojený výskyt plasmonů a navýšení lokálního pole zesiluje ramanovská spektra. Dalšího využití nacházejí plasmony nanočástic v jednočásticové spektrometrii, při zobrazování buňkových struktur a při konstrukci senzorů. Plasmony nanočástic se též jeví jako velice slibné pro vytvoření materiálů se záporným indexem lomu.

# 3. Optická luminiscence

## 3.1. Luminiscence

Luminiscencí rozumíme světelné vyzařování z objektu, které nemá tepelnou povahu, tj. není způsobeno teplotou objektu. Luminescence může být vyvolána například chemickými reakcemi, elektrickým polem, apod. Vzniká relaxací excitovaného elektronu při níž je z atomu vyzařena energie v podobě fotonu.

Pokud například umístíme molekuly fluorescenčního barviva nebo kvantové tečky do blízkého okolí plasmonů a pokud frekvence s jakou se plasmony šíří leží v okolí maxima absorpčního spektra těchto částic, mohou je plasmony excitovat. Tyto částice se tak stávají emitory optického záření. Intenzita tohoto vyzařování je pak úměrná intenzitě lokálního pole v bodě, kde se tyto emitory nacházejí. Tohoto lze například využít ke zmapování šíření plasmonů na rozhraní kovu a vzduchu. Stačí jen povrch kovu pokrýt molekulami fluorescenčního barviva. Tloušťka vrstvy molekul nesmí být příliš velká, nejlépe pokud vrstva nedosahuje tloušťky ani jedné monovrstvy<sup>1</sup> a index lomu této vrstvy je co nejmenší, aby změna disperze závislosti plasmonů, vyvolaná přítomností luminoforu, byla také co nejmenší. Navýšení lokálního pole vlivem plasmonů pak vyvolá zesílení fluorescence. Mezi povrch a molekuly barviva se obvykle umísťuje ještě přibližně 10 nm vrstva SiO<sub>2</sub>, PMMA nebo jiného vhodného dielektrika, aby se zabránilo vyhasínání luminiscence v důsledku nezářivých přenosů energie mezi plasmony a molekulami barviva.

## 3.2. Optická luminiscence nanostruktur

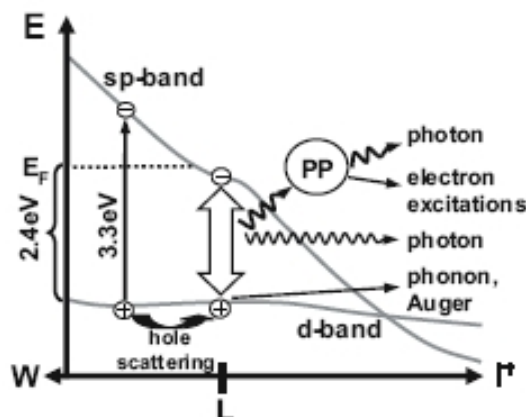
### 3.2.1. Princip optické luminiscence

Optická luminiscence, neboli fotoluminiscence, z většího vzorku ušlechtilého kovu navozená silným spojitým laserovým svazkem byla poprvé pozorována A. Mooradianem roku 1969. Luminiscence vznikla v důsledku excitace elektronů z valenčního d-pásu do vodivostního sp-pásu a jejich následné relaxace. Maximum luminiscenčního energiového spektra tedy přibližně odpovídalo energetickému rozdílu mezi těmito pásy. Nicméně díky převládajícím nezářivým relaxačním procesům byl kvantový výtěžek<sup>2</sup> velmi malý, řádově jen asi  $10^{-10}$  pro hladký povrch. Výrazného zlepšení kvantového výtěžku bylo dosaženo užitím tenkých vrstev s nerovným povrchem, nebo použitím nanočástic. Na jeho zlepšení se mimo jiné podílí i navýšení lokálních polí v okolí nanostruktur vlivem excitace plasmonů.

Na obrázku 3.1 je znázorněna plasmony vyvolaná fotoluminiscence. Excitované elektrony se mohou z sp-pásu do d-pásu vrátit dvěma možnými přechody. První, méně častý, je přímý zářivý přechod. Druhý přechod spočívá v nezářivém přechodu sp-elektronu v plasmon a následném zářivém nebo nezářivém přechodu plasmonu v d-elektron. Protože však vytvoření plasmonu je mnohem pravděpodobnější než přímý přechod elektronu zpět do d-pásu a pravděpodobnost zářivého přechodu plasmonu v d-elektron je relativně velká, je výsledné zesílení fotoluminiscence způsobeno právě vyzářením fotonu při přechodu plasmonu v d-elektron. Tento uvedený jev je lineární povahy a označujeme jej pojmem jednofotonová luminiscence.

<sup>1</sup>molekuly barviva na povrchu netvoří ani jednu souvislou vrstvu

<sup>2</sup>definovaný jako poměr zářivých relaxačních přechodů k celkovému počtu relaxačních přechodů



Obrázek 3.1: Znázornění fotoluminiscence vyvolané plasmony. Převzato z [9].

### 3.2.2. Princip měření rezonančních spekter nanostruktur pomocí optické luminiscence

Zjednodušeně lze říci, že k měření rezonančních spekter nanostruktur pomocí optické luminiscence potřebujeme laserový zdroj, kterým budeme budit luminiscenci nanostruktur, nanostruktury jejichž luminiscenční spektra budeme měřit a spektrofotometr jímž budeme spektra vyhodnocovat.

Jako zdroj laserového světla nám stačí běžně komerčně dostupné lasery o nízkém výkonu - řádově jednotky mW. To, jaký laser zvolíme závisí na povaze studovaného problému. Lze volit například pevnolátkový YAG laser [8] pracující na druhé či třetí harmonické frekvenci, plyný iontový [15] nebo třeba laser zářící v ultrafialové části spektra [16]. Lasery mohou pracovat pulsně [8] nebo kontinuálně [16]. Laserový svazek může být na nanostrukturu fokusován objektivem mikroskopu [11].

Laserové světlo dopadající na nanostruktury vybudí lokalizované plasmony a způsobí jejich zesílenou luminiscenci. Luminiscenční záření emitované z takovýchto nanostruktur zfokusujeme pomocí mikroskopového objektivu do detektoru. Před detektor ještě musíme umístit vhodně zvolený filtr, aby nepropustil záření laseru, které se z povrchu měřeného vzorku odrazilo do mikroskopu. Odražené záření laseru má v porovnání s luminiscenčním zářením od nanostruktur mnohonásobně větší intenzitu, došlo by ke zhoršení kontrastu a detektor by nemusel luminiscenční záření detekovat.

Vhodným detektorem je spektrofotometr, který během jednoho měření umožňuje změřit celé luminiscenční spektrum a najít tak, které vlnové délky odpovídá rezonance. Případně lze také použít spektrometr v kombinaci s CCD kamerou chlazenou tekutým dusíkem [15]. Nemáme-li k dispozici spektrometr, můžeme jeho použít monochromátor [8]. Nevýhodou použití monochromátoru je, že musíme provést velké množství měření pro různé vlnové délky propouštěné monochromátorem, abychom z výsledků těchto měření mohli sestavit luminiscenční spektrum a zjistit rezonanční vlnovou délku. Namísto CCD kamery lze jako detektoru užít například fotonásobič [8] nebo můžeme pro velmi slabou luminiscenci použít jednofotonovou lavinovou diodu [11].

Ať už použijeme jakýkoliv detektor, nemusí mít tento detektor stejnou citlivost detekce pro všechny vlnové délky. Proto je nutné při vyhodnocování výsledků měření luminiscenčních spekter zohlednit spektrální citlivost detektoru. Abychom tuto spektrální citlivost detektoru určili, můžeme použít detektor k vyhodnocení vyzařování černého tě-

### 3.2. OPTICKÁ LUMINISCENCE NANOSTRUKTUR

lesa. Intenzitu záření černého tělesa na jednotlivých vlnových délkách, resp. na malém intervalu  $\langle \lambda; \lambda + \Delta\lambda \rangle$ , lze analyticky určit dle Planckova vyzařovacího zákona. A dáme-li pak do poměru intenzitu naměřenou detektorem s analyticky určenou hodnotu intezity vyzařování černého tělesa, získáme tak spektrální citlivost detektoru pro interval vlnových délek  $\langle \lambda; \lambda + \Delta\lambda \rangle$ .

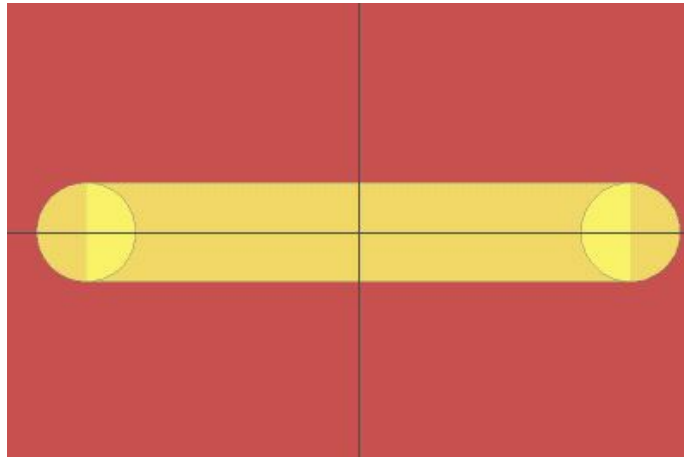
## 4. Simulace a vyhodnocení

### 4.1. Metoda FDTD

Metoda konečných diferencí v časové oblasti (Finite-Difference Time-Domain, FDTD) se v poslední době stala nejužívanější numerickou metodou pro řešení Maxwellových rovnic pro složitější geometrie. Svým pojetím umožňuje řešení téměř všech problémů v elektromagnetismu a fotonice. Metoda umožňuje získat řešení problému v závislosti na poloze, čase a s využitím Fourierovy transformace také v závislosti na frekvenci. Díky tomu může být stanoveno mnoho užitečných veličin jako například komplexní Poyntingův vektor nebo relativní intenzita prošlého nebo odraženého světla.

### 4.2. Simulované antény

K tomu, abychom otestovali možnost použití softwaru Lumerical FDTD Solution 5.1.3 pro simulace navýšení elektrického pole v okolí nanostruktur, jsme využili článek [3]. Navrhli jsme dvě antény. Antény jsou tvořeny ze zlata na křemíkovém substrátu. První anténu budeme dále označovat jako „proužek“ (obr. 4.1). Její celková délka je 1 560 nm, šířka 240 nm a výška 60 nm. Poloměr křivosti na konci antén je 120 nm. Druhá anténa, kterou budeme dále označovat jako „trojúhelník“, má tvar rovnoramenného trojúhelníku (obr. 4.2). Její celková délka je 1 560 nm, výška 60 nm a úhel u zaobleného vrcholu je 15 °. Antény se substrátem obklopuje vzduch.

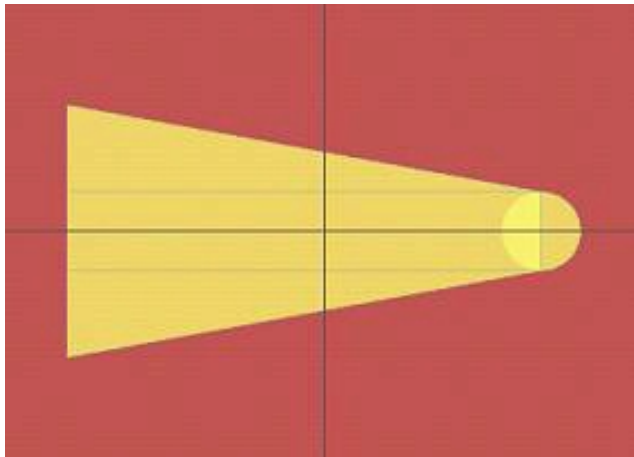


Obrázek 4.1: Anténa „proužek“. Vodorovná, resp. svislá, čára představuje osu  $x$ , resp.  $y$ .

Dielektrická funkce křemíku byla brána z materiálové databáze programu. Dielektrickou funkci zlata materiálová databáze rovněž obsahovala, avšak byla stanovena pouze pro vlnové délky do 2 000 nm. Protože jsme prováděli simulace dopadu elektromagnetického vlnového klubka o střední vlnové délce  $\lambda_0 = 10\,375$  nm na naše antény, nemohli jsme tyto hodnoty dielektrické funkce použít. Aproximace dielektrické funkce pro vlnové délky větší než 2 000 nm, které program dokázal vypočítat, byly totiž od správných hodnot dosti vzdálené. Dielektrickou funkci zlata pro vlnové délky větší než 2 000 nm jsme stanovili dle [14] a tuto funkci následně zadali do programu. Dielektrická funkce křemíku byla v databázi programu zadána rovněž jen pro vlnové délky do 2 000 nm. Nicméně pro křemík



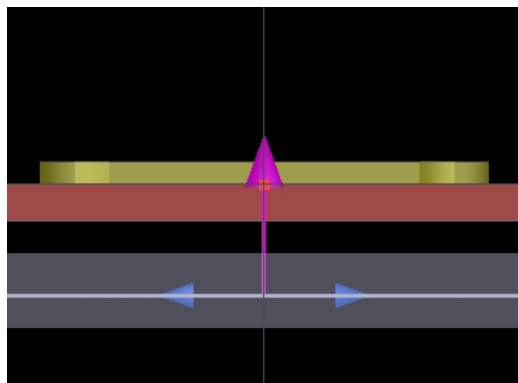
## 4.2. SIMULOVANÉ ANTÉNY



Obrázek 4.2: Anténa „trojúhelník“. Vodorovná, resp. svislá, čára představuje osu  $x$ , resp.  $y$ .

je tato funkce téměř konstantní. Proto jsme se u křemíku spokojili s aproximací, kterou nám program nabídl.

Každá z navržených antén představuje jeden prvek pole tvořeného stejnými anténami. Vzdálenosti mezi středy antén jsou ve směru osy  $x$  i osy  $y$  3 000 nm. Pomocí vhodně zvolených okrajových podmínek jsme simulovali takovátto pole antén. Ve směrech osy  $x$  a osy  $y$  jsme použili periodické okrajové podmínky a velikost simulační oblasti zvolili v obou směrech 3 000 nm, přičemž střed antény se nacházel ve středu simulační oblasti. Ve směru osy  $z$  jsme použili okrajové podmínky PML<sup>1</sup> (Perfectly Matched Layers). Prováděli jsme simulace dopadu rovinného elektromagnetického (infračerveného) vlnového klubka na substrát ze strany, kde se nenacházely antény (obr. 4.3). Klubko dopadá na substrát kolmo, vlnový vektor  $\vec{k}$  je tedy rovnoběžný s osou  $z$  a vektor elektrické intenzity  $\vec{E}$  kmitá ve směru osy  $x$ .



Obrázek 4.3: Schéma dopadu elektromagnetického vlnového klubka na substrát. Vodorovná čára na rozhraní substrátu a antény představuje osu  $x$ , svislá osu  $z$ . Šedý pruh znázorňuje dopadající vlnové klubko, fialová šipka směr vlnového vektoru  $\vec{k}$  a modré šipky směr kmitání vektoru elektrické intenzity  $\vec{E}$ .

<sup>1</sup>veškeré elektromagnetické vlnění opouštějící oblast simulace je pohlceno a utlumenno, nedochází k žádnému odrazu zpět do oblasti simulace.

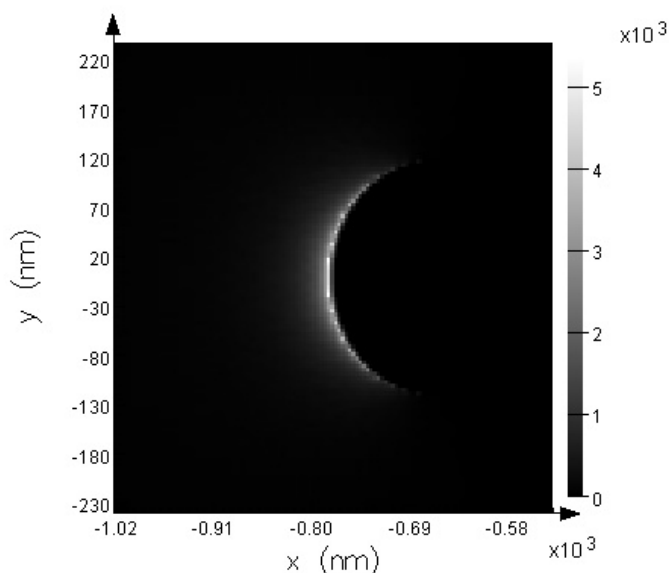
### 4.3. Simulace

Během simulací jsme se zaměřili na následující jevy:

- Lokální navýšení elektrického pole v okolí antén
- Útlum elektrického pole s rostoucí vzdáleností od antény
- Vliv hustoty simulační sítě na simulované vlastnosti pole
- Vliv tvaru antény na simulované vlastnosti pole
- Závislost rezonanční vlnové délky na vlnové délce dopadající vlny
- Závislost rezonanční vlnové délky na rozměru antény

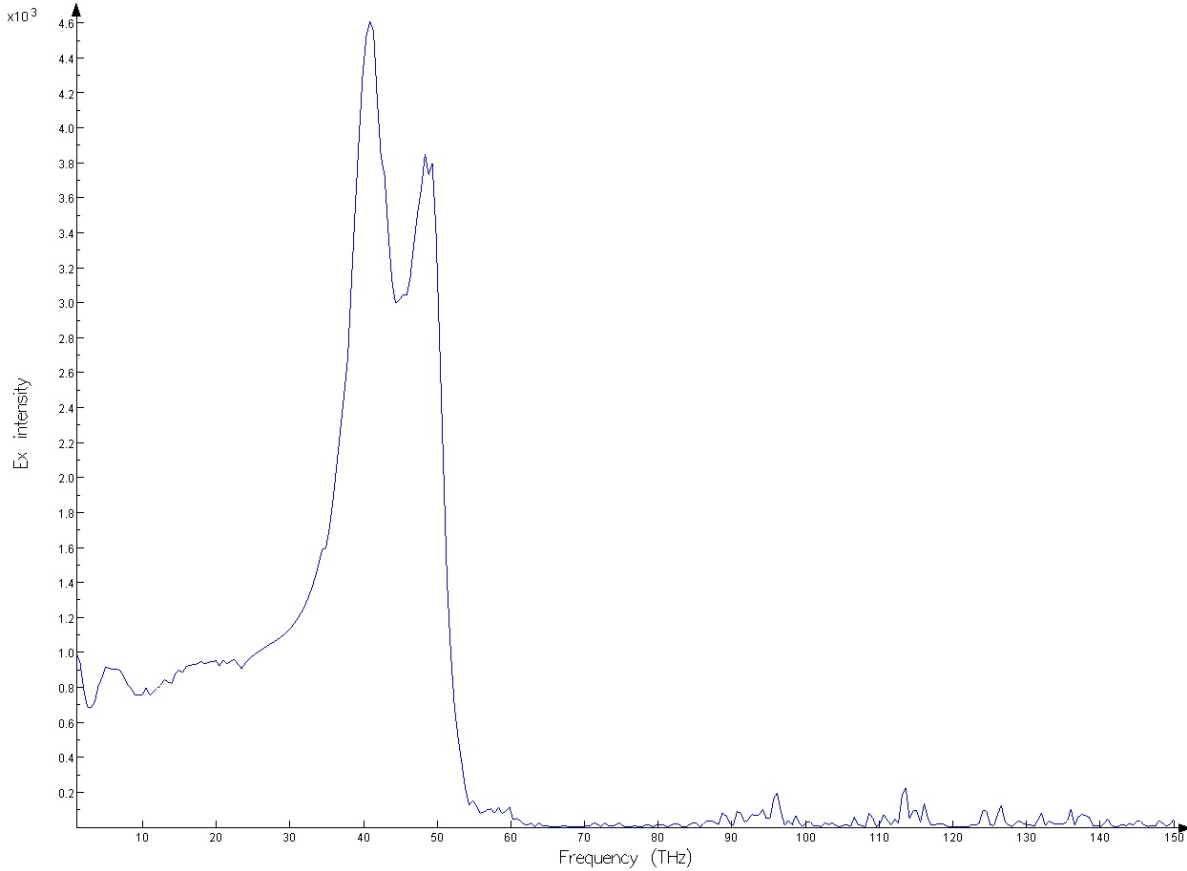
#### 4.3.1. Lokální navýšení elektrického pole v okolí antén a jeho útlum s rostoucí vzdáleností od antény

Na obrázku 4.4 je zobrazena střední hodnota intenzity  $x$ -ové složky vektoru elektrické intenzity  $\langle |E_x|^2 \rangle$  na povrchu „proužku“. Hodnoty intenzity  $\langle |E_x|^2 \rangle$  jsou normalizovány, tj. vztahují se k jednotkové intenzitě dopadajícího záření. Frekvenční a vlnové spektrum tohoto navýšení je zobrazeno na obrázcích 4.5 a 4.6. Výstup z programu ukazuje frekvenční spektrum. Protože nám vlnová délka dává lepší představu o spektru než frekvence, budeme dále uvádět pouze spektra vlnová. Vlnová spektra byla vytvořena exportováním naměřených dat do textového souboru a následným vložením dat z textového souboru do tabulkového procesoru MS Excel.



Obrázek 4.4: Vypočtená střední hodnota relativní intenzity  $x$ -ové složky vektoru elektrické intenzity  $\langle |E_x|^2 \rangle$  na povrchu „proužku“ pro rezonanční vlnovou délku 7 247 nm. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka klubka je přibližně 900 nm. Stupnice napravo je bezrozměrná, neboť udává poměr  $\langle |E_x|^2 \rangle$  ku jednotkové intenzitě dopadajícího záření.

### 4.3. SIMULACE



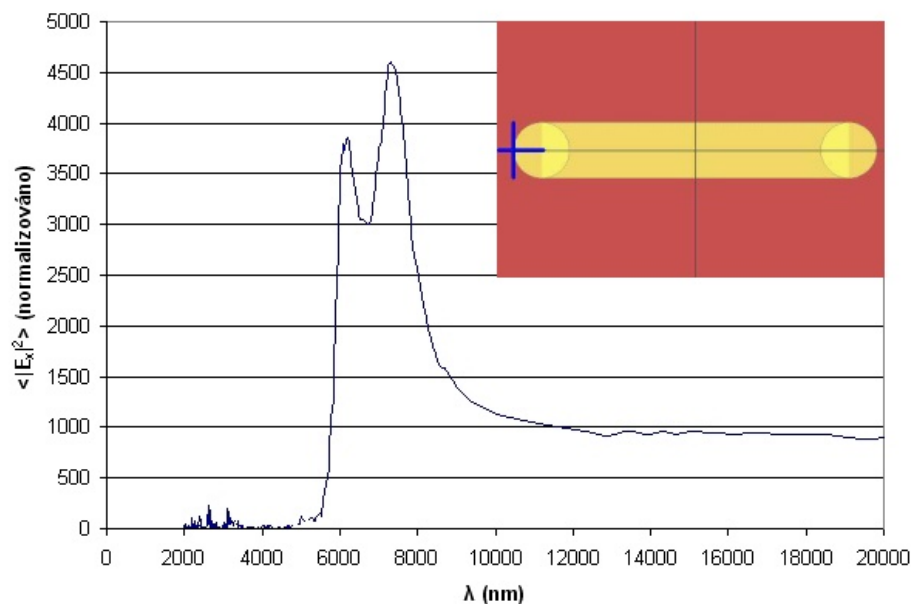
Obrázek 4.5: Frekvenční spektrum elektrického pole na povrchu „proužku“ tak, jak jej zobrazuje program. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm. Simulační síť je lokálně zahuštěná s velikostí simulační buňky 4 nm. Veličina „Ex intensity“ je bezrozměrná, neboť udává poměr vypočtené  $\langle |E_x|^2 \rangle$  ku jednotkové intenzitě dopadajícího záření.

Problém rezonanční vlnové délky, která pro tuto simulaci neodpovídá teoretické rezonanční vlnové délce je diskutován v kapitole 4.3.4.

#### 4.3.2. Vliv hustoty simulační sítě na simulované vlastnosti pole

Hustota simulační sítě se v programu zadává pomocí proměnné „mesh“. Dle „mesh“ program stanoví hustotu simulační sítě a sám také síť zahustí poblíž rozhraní mezi kovem a dielektrikem. Například, když se simulační buňka nachází v dielektriku a v dostatečné vzdálenosti od kovu, je tvaru krychle o hraně přibližně 25 nm, ale uvnitř kovu a v jeho blízkém okolí má buňka tvar krychle o hraně přibližně 7,5 nm. Pokud nám nevyhovuje hustota sítě, kterou stanovil program, je možné zadat hustotu sítě ručně například tím, že zadáme rozměry simulační buňky. Ručně zahuštěná síť v celé simulační oblasti ovšem v naprosté většině případů mnohonásobně prodlužuje dobu simulace a zvyšuje její paměťové nároky.

Proto je zde ještě třetí možnost — kompromis. Je možné nechat program, aby dle proměnné „mesh“ stanovil hustotu sítě, a pomocí „mesh override“ vyznačit jen určitou oblast simulace, kde následně síť ručně zahustíme. Takovéto lokální zahuštění sítě prodlužuje simulační dobu mnohem méně, než je tomu v případě zahuštění celé simulační



Obrázek 4.6: Vlnové spektrum elektrického pole na povrchu „proužku“ popisující spektrální závislost navýšení tohoto pole. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm. Simulační síť je lokálně zahuštěná s velikostí simulační buňky 4 nm. Hodnoty na ose  $\langle |E_x|^2 \rangle$  jsou normalizovány, tj. vztaženy k jednotkové intenzitě dopadajícího záření. Modrý kříž na vloženém obrázku antény označuje bod v němž jsme spektrum určovali.

oblasti, a má poměrně malý dopad na paměťové nároky simulace. Tato možnost je rovněž doporučena v referanční příručce [7], pro případy simulací interakce elektromagnetických polí s rozhraními kovů a dielektrika.

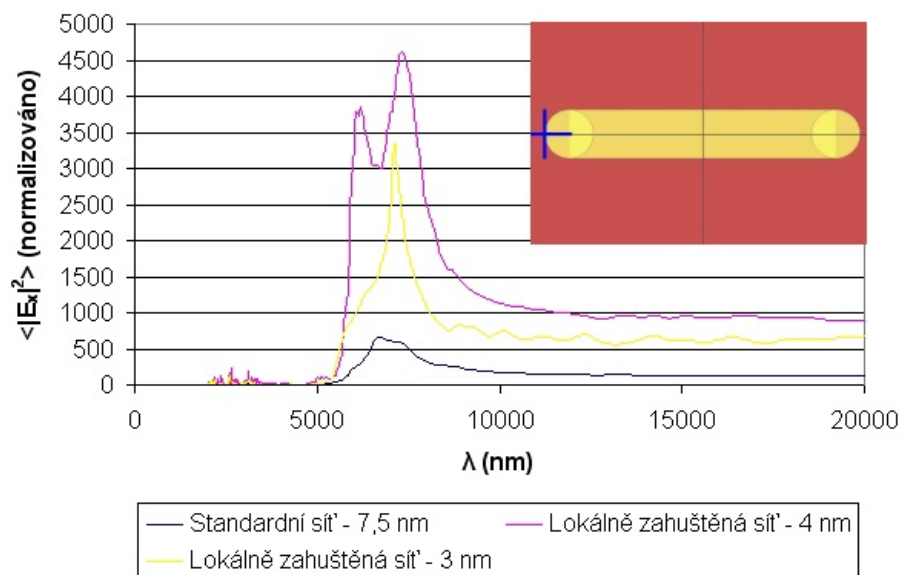
Jak vidíme z obrázků 4.7, 4.8 a 4.9, hustota simulační sítě má obrovský vliv na simulované vlastnosti elektrického pole. Z obrázků 4.8 a 4.9 je dobře patrný evanescentní charakter těchto vybuzených vln.

### 4.3.3. Vliv tvaru antény na simulované vlastnosti pole

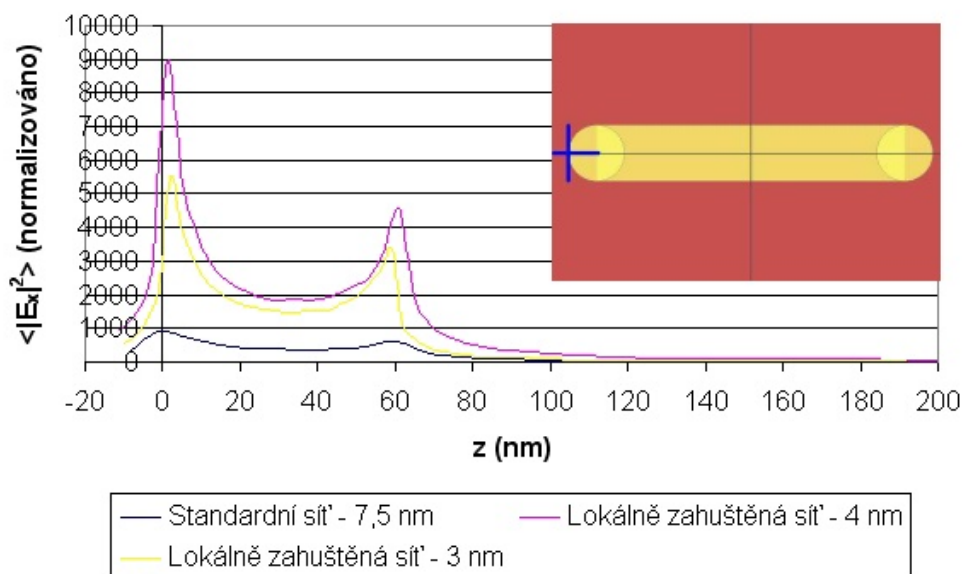
Nyní se zaměříme na srovnání našich dvou antén, „proužku“ a „trojúhelníka“. Obě antény mají stejnou délku, výšku a poloměry křivosti. Jsou ze stejného materiálu, a tedy mají i stejnou dielektrickou funkci a nacházejí se na stejném substrátu. U obou simulujeme dopad světla o stejné vlnové délce. Liší se pouze tvarem. Antény jsou popsány v kapitole 4.2 a vyobrazeny na obrázcích 4.1 a 4.2.

Z obrázků je patrné 4.10 a 4.11, že tvar antény má vliv na rezonanční vlnovou délku, na velikost navýšení elektrického pole v blízkém okolí antény i na závislost navýšení elektrického pole na rostoucí vzdálenosti od antény ve směru osy  $x$ . Resonanční vlnová délka „proužku“ je  $\lambda_r = 7\,248$  nm, „trojúhelníku“  $\lambda_r = 6\,914$  nm. Maximální navýšení intenzity pole na povrchu antény při rezonanční vlnové délce je 4 609-tinásobek intenzity dopadající vlny u „proužku“ a 3 780-tinásobek intenzity dopadající vlny u „trojúhelníka“. U obou antén je těchto maxim dosaženo v těsné blízkosti míst, které jsou na obrázcích vložených do obrázků 4.10 a 4.11 označeny modrými kříži.

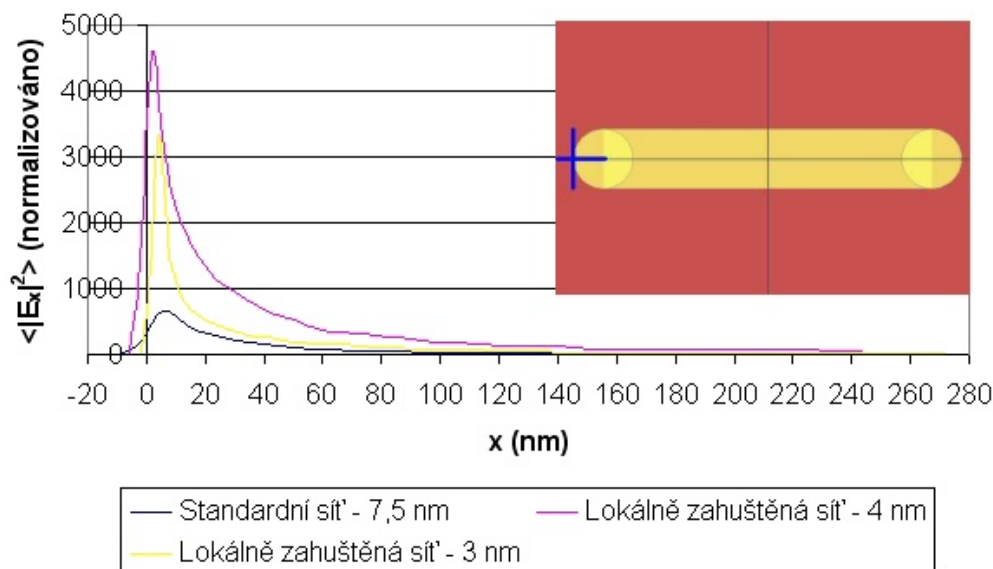
### 4.3. SIMULACE



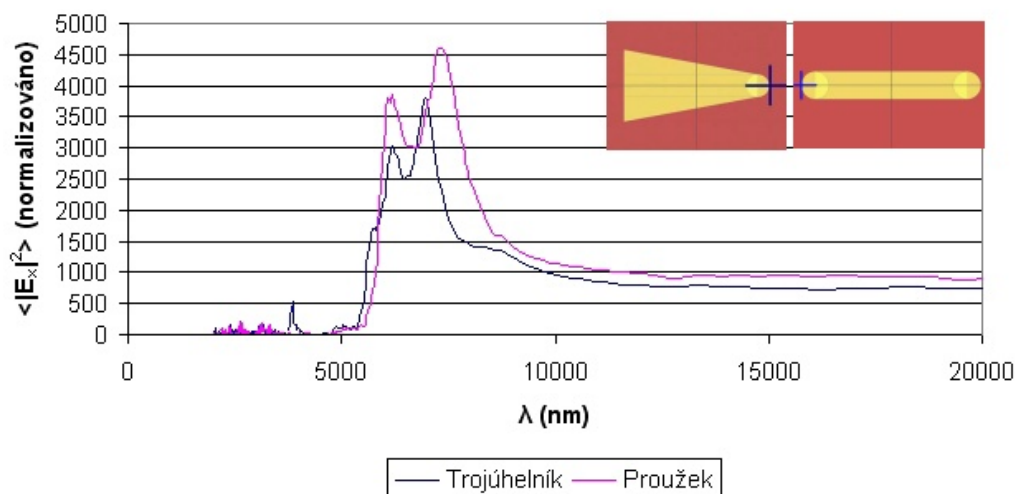
Obrázek 4.7: Vlnová spektra elektrického pole na povrchu „proužku“ pro různé velikosti simulačních buněk. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm. Hodnoty na ose  $\langle |E_x|^2 \rangle$  jsou normalizovány, tj. vztaženy k jednotkové intenzitě dopadajícího záření. Modrý kříž na vloženém obrázku antény označuje bod v němž jsme spektra určovali.



Obrázek 4.8: Závislost navýšení elektrického pole v okolí „proužku“ ve směru osy  $z$  pro různé velikosti simulačních buněk. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm. Rozhraní mezi substrátem a anténou se nachází v  $z = 0$  nm, rozhraní mezi anténou a vzduchem v  $z = 60$  nm. Hodnoty na ose  $\langle |E_x|^2 \rangle$  jsou normalizovány, tj. vztaženy k jednotkové intenzitě dopadajícího záření. Modrý kříž na vloženém obrázku antény označuje bod v němž jsme tuto závislost určovali.



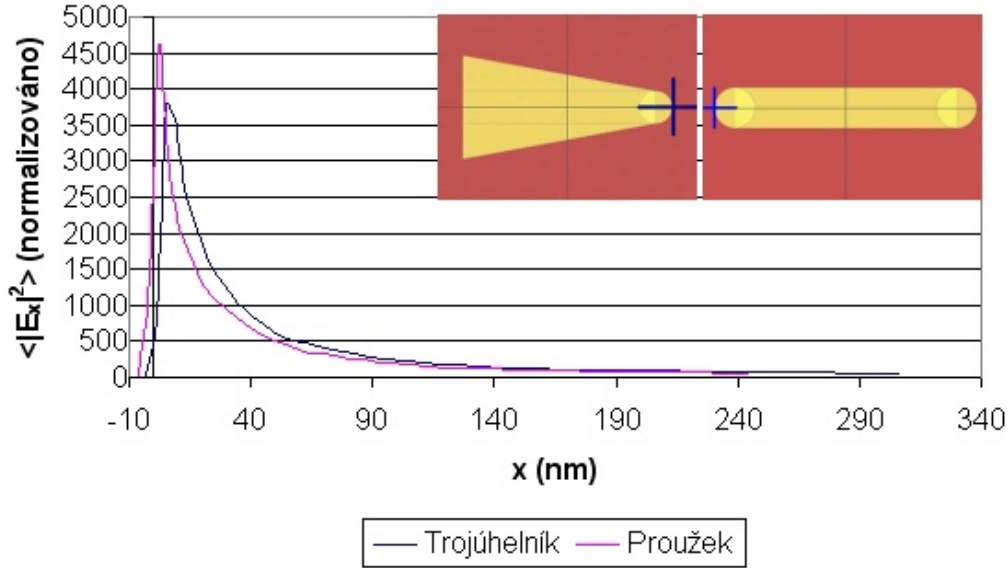
Obrázek 4.9: Závislost navýšení elektrického pole v okolí „proužku“ ve směru osy  $x$ , ve výšce 60 nm nad substrátem, pro různé velikosti simulačních buněk. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm.  $x < 0$  nm označuje oblast uvnitř antény,  $x > 0$  nm oblast vně antény. Hodnoty na ose  $\langle |E_x|^2 \rangle$  jsou normalizovány, tj. vztaženy k jednotkové intenzitě dopadajícího záření. Modrý kříž na vloženém obrázku antény označuje bod v němž klademe  $x = 0$ .



Obrázek 4.10: Vlnové spektrum elektrického pole popisující spektrální závislost navýšení tohoto pole na povrchu „proužku“ a „trojúhelníka“. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm. Simulační síť je lokálně zahuštěná s velikostí simulační buňky 4 nm. Hodnoty na ose  $\langle |E_x|^2 \rangle$  jsou normalizovány, tj. vztaženy k jednotkové intenzitě dopadajícího záření. Modré křížky na vložených obrázcích antén označují body v nichž jsme spektra určovali.

Jaký je vliv tvaru antény na závislost navýšení elektrického pole na rostoucí vzdálenosti od antény ve směru osy  $z$  jsme nezjišťovali. Důvodem byl nedostatek paměti při simulaci „trojúhelníku“. Tato anténa má totiž větší objem než „proužek“, což klade větší paměťové

### 4.3. SIMULACE



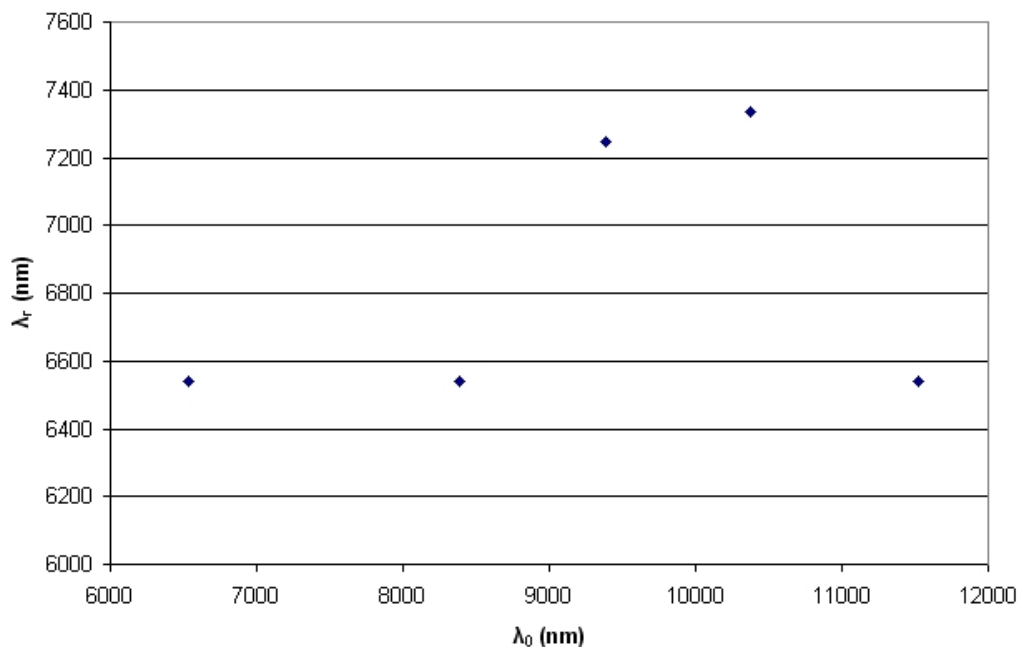
Obrázek 4.11: Závislost navýšení elektrického pole v okolí „proužku“ a „trojúhelníku“ ve směru osy  $x$  ve výšce 60 nm nad substrátem. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm. Simulační síť je lokálně zahuštěná s velikostí simulační buňky 4 nm.  $x < 0$  nm označuje oblast uvnitř antény,  $x > 0$  nm oblast vně antény. Hodnoty na ose  $\langle |E_x|^2 \rangle$  jsou normalizovány, tj. vztaženy k jednotkové intenzitě dopadajícího záření. Modré kříže na vložených obrázcích antén označují body v nichž klademe  $x = 0$ .

nároky na výpočet elektromagnetického pole a indexu lomu v simulačních buňkách, které se nacházejí uvnitř antény. Pro monitorování závislosti navýšení pole ve směru osy  $z$  jednoduše chyběla paměť.

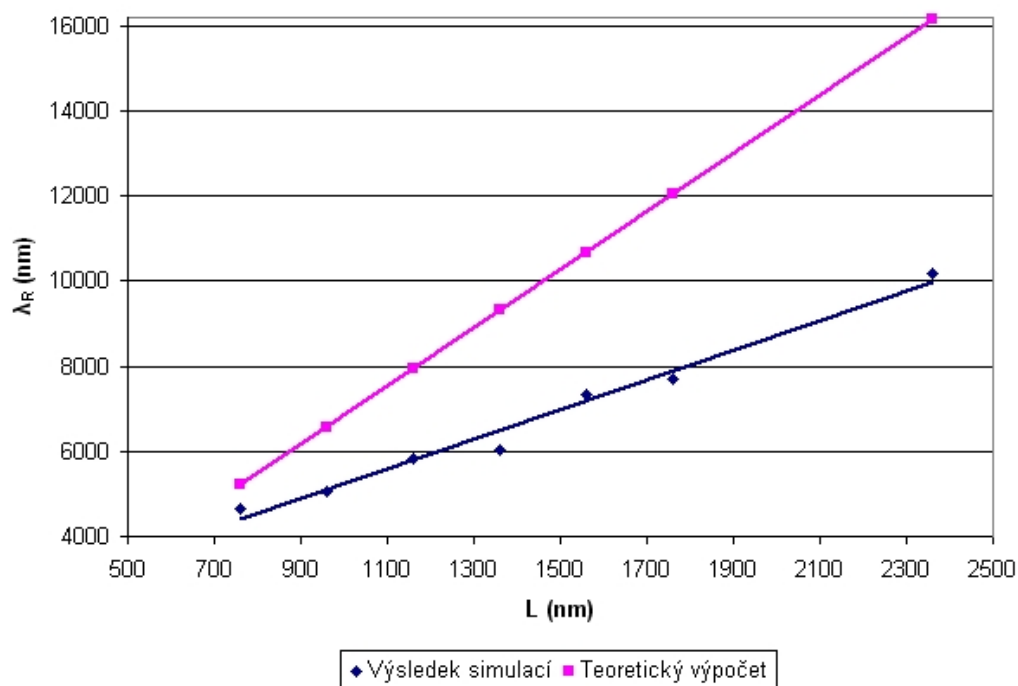
Srovnáme výsledek naší simulace „trojúhelníku“ s výsledkem uvedeným v [3] pro stejnou anténu. Relativní navýšení elektrického pole bylo v našem případě 3 780-tinásobné pro rezonanční vlnovou délku  $\lambda_r = 6\,914$  nm. Elektrické pole u antény uvedené v [3] bylo ve stejném bodě 3 905krát navýšeno, ovšem pro rezonanční vlnovou délku  $\lambda_r = 10\,000$  nm. Tento rozdíl mezi vlnovými délkami je diskutován v následující kapitole.

#### 4.3.4. Závislost rezonanční vlnové délky na vlnové délce dopadajícího záření a na rozměru antény

Nyní se zaměříme na to, jak závisí rezonanční vlnová délka na vlnové délce dopadající vlny a na rozměru antény. Měníme-li středovou vlnovou délku dopadajícího klubka  $\lambda_0$  a nenastavíme-li spektrální pološířku klubka ručně, budeme mít pro každou  $\lambda_0$  jinou spektrální pološířku, program totiž sám tuto pološířku mění. Navíc program vždy simuluje pouze dopad elektromagnetického pulsu o konečné době trvání. Abychom zabránili chybám, které by mohly při simulacích vzniknout právě vlivem různé spektrální pološířky klubek o různých  $\lambda_0$  nebo různými dobami trvání pulsu, užíváme při všech těchto simulacích CW (Continuous Wave) normalizaci. CW normalizace zajistí, že zobrazené výsledky simulace jsou stejné, jako kdybychom použili spojitou vlnu o vlnové délce  $\lambda_0$ . CW normalizace tak odstraňuje jakoukoliv frekvenční závislost, jež by byla způsobena konečnou dobou trvání pulsu ze zdroje záření.



Obrázek 4.12: Závislost rezonanční vlnové délky  $\lambda_r$  na střední vlnové délce  $\lambda_0$  dopadajícího vlnového klubka pro „proužek“ o délce  $L = 1\,560$  nm (s užitím CW normalizace).



Obrázek 4.13: Závislost rezonanční vlnové délky  $\lambda_r$  a teoretické rezonanční vlnové délky  $\lambda_{r,t}$  na délce antény  $L$  pro „proužek“. Střední vlnová délka dopadajícího záření je  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm.

Z grafu na obrázku 4.12 není patrné, že by rezonanční vlnová délka  $\lambda_r$  nějak závisela na vlnové délce dopadajícího záření  $\lambda_0$ . Naproti tomu z grafu na obrázku 4.13 a z tabulky 4.1 je patrné, že zde existuje lineární závislost mezi rezonanční vlnovou délkou  $\lambda_r$  a délkou



### 4.3. SIMULACE

antény  $L$ . Vidíme však také, že rezonanční vlnové délky získané pomocí našich simulací se značně liší od teoretických rezonančních vlnových délek  $\lambda_{r,t}$  určených dle rovnice 4.1.

$$\lambda_{r,t} = 2 n L, \quad (4.1)$$

kde  $L$  je délka antény a  $n$  je index lomu. V tomto případě lze říci, že index lomu křemíkového substrátu  $n \doteq 3,425$  je roven efektivnímu indexu lomu, definovanému takto:

$$n_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{\varepsilon(\omega) \varepsilon_d}{\varepsilon(\omega) + \varepsilon_d}}, \quad (4.2)$$

kde  $\varepsilon(\omega)$  je dielektrická funkce kovu a  $\varepsilon_d$  je dielektrická funkce substrátu.

Hodnota dielektrické funkce zlata pro úhlovou frekvenci  $\omega_0$  odpovídající vlnové délce  $\lambda_0 = 10\,375$  nm je  $\varepsilon(\omega) = -3\,606 + 1\,610i$ , hodnota dielektrické funkce křemíku je  $\varepsilon_d = 11,7$ . Dosazením těchto hodnot do vztahu 4.2 uvidíme, že hodnota efektivního indexu lomu je  $n_{\text{eff}} = 3,425$ .

Zatím nám není znám důvod, proč se vypočtené rezonanční vlnové délky natolik odlišují od teoretických výsledků. Například při experimentu popsaném v [11] se také vyskytuje zmínka o tom, že naměřená rezonanční vlnová délka výrazně nesouhlasí s teoretickou rezonanční vlnovou délkou. Také v [13] se autor zmiňuje o experimentech prováděných v infračervené oblasti spektra, při kterých byla rezonanční vlnová délka o 20 % menší než teoretická rezonanční vlnová délka. Tato neshoda mezi teoreticky vypočtenými a simulovanými rezonančními vlnovými délkami by se mohla stát součástí naší případné další práce.

Tabulka 4.1: Rezonanční vlnová délka  $\lambda_r$  stanovená simulací a teoretická rezonanční vlnová délka  $\lambda_{r,t}$  pro různé délky antén  $L$ .

$L$ (nm)	$\lambda_r$ (nm)	$\lambda_{r,t}$ (nm)
760	4 663	5 206
960	5 055	6 576
1 160	5 840	7 946
1 360	6 015	9 316
1 560	7 247	10 686
1 760	7 712	12 056
2 360	10 195	16 166

#### 4.3.5. Vliv normalizace amplitud jednotlivých vln ve vlnovém klubku

Naše antény v naprosté většině případů osvětluje vlnovým klubkem o spektrální pološířce 900 nm a střední vlnové délce  $\lambda_0 = 10\,375$  nm, přesto se nám ve výsledcích simulací objevují výrazné píky odpovídající rezonanci na vlnových délkách, které by neměly být ve vlnovém klubku téměř vůbec obsaženy. Neurčíme-li jinak, program normalizuje amplitudy všech vln obsažených ve vlnovém klubku. Z hlediska programu toto znamená přibližně následující.

Řekněme, že chceme sledovat spektrum mezi frekvencemi  $f_1$  a  $f_2$ . Interval mezi frekvencemi  $f_1$  a  $f_2$  rozdělíme pomocí nastavení programu na  $m - 1$  stejně velkých podintervalů.

Program nyní bude k vlnovému klubku přistupovat tak, jako by se skládalo z  $m$  různých vln o stejné amplitudě a o vlnových délkách  $\lambda_1, \lambda_1 + \delta\lambda, \lambda_1 + 2\delta\lambda, \dots, \lambda_1 + (m-1)\delta\lambda = \lambda_2$ .

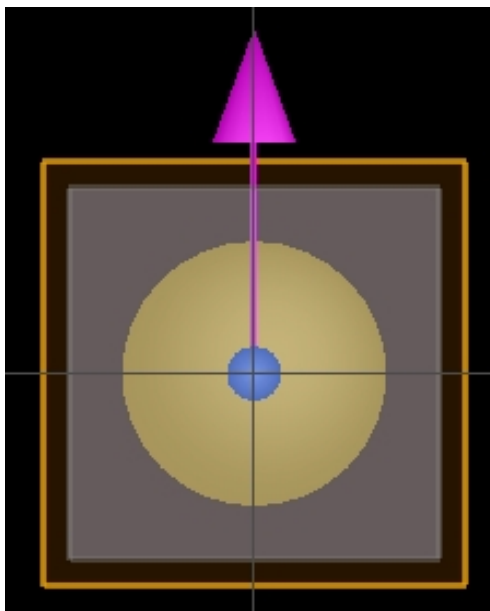
Tedy vlna, která by se ve skutečnosti v klubku téměř nevyskytovala, tj. její amplituda by se blížila nule, se v klubku během simulací vyskytuje a její amplituda je stejná jako amplituda všech ostatních vln v klubku. Tato normalizace umožňuje získat během jediné simulace spektrální závislost navýšení pole v okolí antén pro všechny vlnové délky bez ohledu na střední vlnovou délku klubka  $\lambda_0$ . Toto bylo potvrzeno i našimi dalšími simulacemi, kdy rezonanční spektra pro různé střední vlnové délky  $\lambda_0$  měla velmi podobný tvar.

## 5. Srovnání s teoretickým výpočtem

### 5.1. Formulace problému

Srovnáme nyní výsledek simulace s analytickým řešením. Abychom toto srovnání mohli vůbec provést, musíme si vybrat takovou úlohu, jež je analytickými metodami řešitelná. Problém, který jsme si k tomuto srovnání vybrali, a postup jeho analytického řešení je uveden v [9], str. 66–70.

Mějme zlatou nanočástici tvaru koule o poloměru  $a = 25$  nm, která je ze všech stran obklopena vzduchem. Počátek kartézského souřadného systému umístíme do středu částice. Částici ozařujeme elektromagnetickým vlnovým klubkem o střední vlnové délce  $\lambda_0 = 10\,375$  nm. Spektrální pološířka vlnového klubka je přibližně 900 nm. Protože průměr koule  $2a$  je mnohem menší než střední vlnová délka  $\lambda_0$ , lze užít kvazistatickou aproximaci<sup>1</sup>. Tím se náš problém zjednoduší na problém částice v elektrostatickém poli. Dále uvažujeme, že zdroj statického elektrického pole se nachází v počátku souřadného systému. Nanočástice je charakterizována dielektrickou funkcí  $\varepsilon(\omega)$ , dielektrická funkce okolního média (vzduchu) je  $\varepsilon_m$ . Nanočástice je zobrazena na obrázku 5.1. Interaguje s vnějším elektrostatickým polem a sama se následně chová jako dipól. Výsledné elektromagnetické pole v okolí částice je pak určeno součtem vnějšího pole a pole od dipólu.



Obrázek 5.1: Simulovaná nanočástice. Vodorovná čára představuje osu  $x$ , svislá osu  $y$ . Fialová šipka ukazuje směr vlnového vektoru  $\vec{k}$ . Modrý kruh znázorňuje kmitání elektrické intenzity ve směru osy  $z$ . Oranžový čtverec představuje oblast lokálního zahuštění simulační sítě. Šedý čtverec znázorňuje působící elektrické pole.

<sup>1</sup>fázi oscilujícího elektromagnetického pole považujeme v celém objemu částice za konstantní

## 5.2. Simulace a analytický výpočet

K simulaci tohoto problému byl z webové stránky [21] stažen soubor obsahující simulaci Mieho rozptylu<sup>2</sup> ve třech dimenzích. Simulace byla následně upravena tak, aby splňovala podmínku pro kvazistatickou aproximaci, tj.  $2a \ll \lambda_0$ .

Analytický výpočet byl prováděn v programu Maple. Jak je ukázáno v [9], výsledné pole v bodě o polohovém vektoru  $\vec{r} = (x, y, z)$  v blízkém okolí<sup>3</sup> nanočástice je popsáno pomocí následujících vztahů:

$$\vec{E}_{out} = \vec{E}_0 + \frac{3\vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{p}) - \vec{p}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{1}{r^3}, \quad (5.1)$$

$$\vec{H}_{out} = \vec{H}_0 + \frac{i\omega}{4\pi} (\vec{n} \times \vec{p}) \frac{1}{r^2}, \quad (5.2)$$

kde  $\vec{E}_{out}$ ,  $\vec{H}_{out}$  je elektrická a magnetická složka výsledného elektromagnetického pole,  $\vec{E}_0$ ,  $\vec{H}_0$  je elektrická a magnetická složka vnějšího elektrostatického pole,  $\vec{p}$  je dipólový moment nanočástice,  $r$  je velikost polohového vektoru,  $\vec{n}$  je jednotkový vektor ve směru polohového vektoru ( $\vec{n} = \vec{r}/r$ ),  $\omega$  je úhlová frekvence vnějšího elektrostatického pole a  $\epsilon_0$  je permitivita vakua.

Dipólový moment nanočástice  $\vec{p}$  je dán vztahem:

$$\vec{p} = 4\pi\epsilon_0\epsilon_m a^3 \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \vec{E}_0, \quad (5.3)$$

kde  $\epsilon$  je dielektrická funkce materiálu nanočástice.

V našem případě jsou veličiny rovny:

$$\begin{aligned} \omega &= 186,51 \text{ THz}, \\ \vec{E}_0 &= (0, 0, 1) \text{ V/m}, \\ \vec{H}_0 &= \left( \frac{1}{\mu_0 c}, 0, 0 \right) \text{ A/m}, \\ \epsilon_0 &= 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}, \\ \epsilon_m &= 1, \\ \epsilon &= -3\,606 + 1\,610i, \end{aligned}$$

kde  $c$  je rychlost světla ve vakuu ( $c = 299\,792\,458 \text{ m/s}$ ) a  $\mu_0$  je permeabilita vakua ( $4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H/m}$ ).

Nyní již máme zadáno vše potřebné k výpočtu výsledného elektromagnetického pole. Uvažujme bod o souřadnicích  $[40, 40, -60] \text{ nm}$ . Výsledky získané analytickým výpočtem a simulací jsou uvedeny v tabulce 5.1.

Jak vidíme z tabulky 5.1, hodnoty veličin získaných analyticky a numericky se liší jen nepatrně. Jedinou výjimkou je hodnota reálné části  $x$ -ové složky komplexního Poyntingova vektoru  $\Re(S_x)$ . Podívejme se na to, jak je komplexní Poyntingův vektor definován. Platí

$$\vec{S}_{out} = \vec{E}_{out} \times \vec{H}_{out}^*, \quad (5.4)$$

<sup>2</sup>rozptylu elektromagnetického záření na nanočásticích

<sup>3</sup>za blízké okolí nanočástice považujeme oblast, v níž je splněna podmínka  $kr \ll 1$ , kde  $k = 2\pi/\lambda_0$

## 5.2. SIMULACE A ANALYTICKÝ VÝPOČET

kde  $\vec{H}_{out}^*$  je vektor komplexně sdružených složek ke složkám vektoru  $\vec{H}$ .

Můžeme psát:

$$\vec{S}_{x,out} = E_{y,out}H_{z,out}^* - E_{z,out}H_{y,out}^*. \quad (5.5)$$

Výsledky  $S_{x,out}$  získané analyticky a numericky se od sebe výrazně liší nejspíše proto, že při analytickém výpočtu je výraz  $E_{y,out}H_{z,out}^*$  roven nule, zatímco při simulaci je nenulový.

Tabulka 5.1: Srovnání analyticky a numericky určených veličin.  $\Re(S_i)$  označuje reálnou část  $i$ -té složky komplexního Poyntingova vektoru.

veličina	analytický výpočet	simulace
$ E_{x,out} ^2 \text{ ((V/m)}^2\text{)}$	$5,58 \cdot 10^{-2}$	$3,32 \cdot 10^{-2}$
$ E_{y,out} ^2 \text{ ((V/m)}^2\text{)}$	$5,58 \cdot 10^{-2}$	$3,32 \cdot 10^{-2}$
$ E_{z,out} ^2 \text{ ((V/m)}^2\text{)}$	1,28	1,21
$ H_{x,out} ^2 \text{ ((A/m)}^2\text{)}$	$7,05 \cdot 10^{-6}$	$7,05 \cdot 10^{-6}$
$ H_{y,out} ^2 \text{ ((A/m)}^2\text{)}$	$2,06 \cdot 10^{-10}$	$1,26 \cdot 10^{-10}$
$ H_{z,out} ^2 \text{ ((A/m)}^2\text{)}$	0	$1,91 \cdot 10^{-14}$
$\Re(S_{x,out}) \text{ (W/m}^2\text{)}$	$-4,44 \cdot 10^{-8}$	$1,53 \cdot 10^{-7}$
$\Re(S_{y,out}) \text{ (W/m}^2\text{)}$	$3,00 \cdot 10^{-3}$	$2,91 \cdot 10^{-3}$
$\Re(S_{z,out}) \text{ (W/m}^2\text{)}$	$6,27 \cdot 10^{-4}$	$4,83 \cdot 10^{-4}$

Celkově tak lze říci, že výsledky této simulace jsou uspokojivé a srovnatelné s výsledky analytického výpočtu. Výsledky simulací prováděných v programu Lumerical FDTD Solution 5.1.3 tak lze považovat za důvěryhodné.

## 6. Závěr

Tato bakalářská práce se zabývala možností použití programu Lumerical FDTD Solution 5.1.3 k simulaci lokálního navýšení elektrického pole v okolí plasmonických rezonančních antén. V programu byly navrženy dvě antény, jedna ve tvaru proužku a druhá ve tvaru trojúhelníku. Pomocí okrajových podmínek byla z těchto antén vytvořena pole antén s roztečí 3 000 nm ve směru osy  $x$  i osy  $y$ . Byly provedeny simulace osvětlení antén vlnovým klubkem o střední vlnové délce klubka 10 375 nm a bylo sledováno elektrické pole v okolí antén. Pro vyhodnocení výsledků simulací program umožňuje zobrazit celou řadu závislostí.

Bylo využito možnosti zobrazení frekvenčního spektra ke stanovení rezonanční frekvence, zobrazení navýšení lokálního pole kolem antén v dané rovině při dané frekvenci a zobrazení navýšení lokálního pole v závislosti na vzdálenostech od os souřadného systému. Pro srovnání výsledků více simulací bylo použito exportu simulovaných dat do textového souboru nebo do souboru prostředí Matlab.

Součástí programu je také vlastní skriptovací jazyk, který by mimo jiné měl uživateli umožnit vytvořit různé grafy nebo obrázky jím zvolených závislostí, ať už tyto závislosti budou jakékoliv. Nicméně skriptovací jazyk nebyl předmětem našeho testu.

Srovnáním výsledku simulace s výsledkem analytického výpočtu pro problém rozptylu elektromagnetického záření na nanočástici tvaru koule v kvazistatické aproximaci se dospělo k závěru, že program, metoda a simulace pracují po věcné stránce správně.

Celkově tak lze říci, že tento program je možné bez problémů použít k simulaci navýšení pole v okolí nanostruktur. Program je velice uživatelsky příjemný a práce v něm je poměrně jednoduchá a snadno pochopitelná i pro úplného začátečníka. Umožňuje během simulace sledovat a zaznamenávat všechny veličiny popisující elektromagnetické pole, simulovat různé zdroje elektromagnetického záření a snadno v něm vytvářet jednodušší geometrie. U složitějších objektů je možné tyto objekty vytvořit složením z jednodušších objektů, nebo zadáním jejich matematických vyjádření, tedy pomocí rovnic analytické geometrie. Program dále podporuje import dat v textovém nebo bitmapovém formátu a je v něm tedy možné vytvářet simulace reálných struktur tím, že do programu importujeme data získaná při měření těchto struktur například pomocí AFM mikroskopu. Uživatel pak jen musí programu určit, jakou oblast chce importovat a zadat rozměry této oblasti, případně zvolit měřítko.

Snad jedinou nevýhodou programu je, že spektrum zobrazuje pouze v závislosti na frekvenci. Není zde jednoduchá možnost, jak spektra zobrazit v závislostech na vlnové délce. Nevýhodou samotné metody FDTD (a následkem toho i další nevýhodou programu) je paměťová a obrovská časová náročnost prováděných simulací. Nicméně program podporuje paralelní provádění simulace až na 128 procesorech, které by mělo dle výrobců přímo úměrně snižovat potřebnou dobu simulace. Tato možnost však nebyla testována.

Dále bylo pojednáno o užití kovových nano a mikročástic v plasmonice, Konkrétně byla zmíněna možnost užití nano a mikrostruktur při konstrukci vlnovodů vedoucích energii v podobě plasmonů, i nanočásticových vlnovodů vedoucích energii pomocí indukovaní plasmonové rezonance v jednotlivých nanočásticích. Dále jsme byly uvedeny i některé struktury, jimiž lze měnit směr šíření plasmonů. A v neposlední řadě byla uvedena důležitost funkce plasmonických rezonančních struktur jako optických antén.

O fyzikálním principu fotoluminiscence nanostruktur a o metodě pro měření luminiscenčních spekter plasmonických nanostruktur bylo pojednáno ve třetí kapitole.

# Literatura

- [1] BARNES, W. L., DEREUX, A. and EBBESEN, T. W.: Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, 424, 2003, p. 824-830.
- [2] BRONGERSMA, M. L., et al.: Plasmonics - the missing link between nanoelectronics and microphotronics. *Appl. Phys. A*, 89, 2007, p. 221-223.
- [3] CROZIER, K. B., et al.: Optical antennas: Resonators for local field enhancement. *J. Appl. Phys.*, October 2003, vol. 94, no. 7, p. 4632-4642.
- [4] CHARBONNEAU, R., et al.: Experimental observation of plasmon polariton waves supported by a thin metal film of finite width. *Opt. Lett.*, 2000, vol. 25, no. 11, p. 844-846.
- [5] DITLBACHER, H., et al.: Two-dimensional optics with surface plasmon polaritons. *Appl. Phys. Lett.*, September 2002, vol. 81, no. 10, p. 1762-1764.
- [6] FARAHANI, J.N., et al.: Single Quantum Dot Coupled to a Scanning Optical Antenna: A Tunable Superemitter *Phys. Rev. Lett.*, 95, 2005, 017402.
- [7] *FDTD Solutions Reference Guide*. Lumerical Solutions, Inc., 2007. 220 p.
- [8] LINNROS, J., et al.: Analysis of the stretched exponential photoluminescence decay from nanometer-sized silicon crystals in SiO<sub>2</sub>. *J. Appl. Phys.*, December 1999, vol. 86, no. 11, p. 6128-6134.
- [9] MAIER, S.A.: *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer, 2007. 223 p. ISBN 978-0-387-33150-8.
- [10] MAIER, S.A., et al.: Plasmonics - A Route to Nanoscale Optical Devices. *Adv. Mater.*, October 2001, vol. 13, no.19, p. 1501-1505.
- [11] MÜHLSCHLEGEL, P., et al.: Resonant Optical Antennas. *Science*, June 2005, 308, p. 1607-1609.
- [12] NIKOLAJSEN, T., et al.: Surface plasmon polariton based modulators and switches operating at telecom wavelengths. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, vol. 85, no.24, p. 5833-5835.
- [13] NOVOTNY, L.: Effective Wavelength Scaling for Optical Antennas. *Phys. Rev. Lett.*, 98, 2007, 266802.
- [14] RACIC A. D., et. al.:Optical Properties of Metallic Films for Vertical - Cavity Optoelectronic Devices. *Appl. Opt.*, 1998, vol. 37, no. 22, p. 5271-5283
- [15] TEWARY, A., ROHAN, K. P., BRONGERSMA, M. L.: Controlling defect and Si nanoparticle luminescence from silicon oxynitride films with CO<sub>2</sub> laser annealing. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, 88, 093114.
- [16] VALENTA, J., JUHASZ, R., LINNROS J.: Photoluminescence spectroscopy of single silicon quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* February 2002, vol. 80, no. 6, p. 1070-1072.



## LITERATURA

- [17] WANG, H., et al.: Light scattering from spherical plasmonic nanoantennas: effects of nanoscale roughness. *Appl. Phys. B*, 84, 2006, p. 191-195.
- [18] WARD, D. W., NELSON K. A.: Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Simulations of Electromagnetic Wave Propagation Using a Spreadsheet. *Comput. Appl. Eng. Educ.*, 13, 2005, p. 213-221.
- [19] WEI, Q.-H., et al.: Plasmon Resonance of Finite One-Dimensional Au Nanoparticle Chains. *Nano Letters*, 2004, vol. 4, no. 6, p. 1067-1071.
- [20] [http://www.lumerical.com/fdtd\\_online\\_help/fdtd\\_online\\_help\\_summary.php](http://www.lumerical.com/fdtd_online_help/fdtd_online_help_summary.php)
- [21] [http://www.lumerical.com/fdtd\\_online\\_help/sp\\_mie\\_scattering\\_3d.php](http://www.lumerical.com/fdtd_online_help/sp_mie_scattering_3d.php)

# Seznam použitých zkratek

CW	Continuous wave, spojitá vlna
FDTD	Finite-Difference Time-Domain, konečné difference v časové doméně
IMI	Insulator - Metal - Insulator, izolant - kov - izolant
LSP	Localized surface plasmon, lokalizovaný povrchový plasmon
PLM	Perfectly matched layers. Typ okrajových podmínek pro numerickou metodu FDTD.
PMMA	Polymethylmetakrylát
SERS	Surface Enhanced Raman Spectroscopy, ramanovská spektroskopie
SPP	Surface plasmon polariton, povrchový plasmonový polariton